

Получение и исследование свойств фторидов неодима и празеодима

Медведев Родион Олегович

Орлов Владислав Викторович

Национальный исследовательский Томский политехнический институт

Сачкова Анна Сергеевна, к.б.н.

rodionmedvedev7@gmail.com

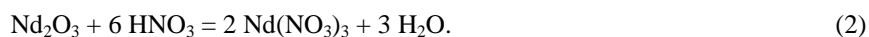
Начиная с середины 20 века и по сегодняшний день для науки и промышленности большой интерес представляют редкоземельные металлы (РЗМ) и их соединения, что связано со многими их физико-химическими свойствами, такими как высокие температуры плавления, магнитные свойства, величина сечения захвата электронов и т.д. В связи с ростом потребления соединений РЗМ изучение их свойств, а так же способов синтеза является необходимым. Так, фториды РЗМ используют для получения высококачественных оптоволоконных световодов для волоконной оптики, специального стекла и керамики, металлов металлотермическим способом. Металлотермия фторидных солей редкоземельных элементов является одним из способов синтеза сильных магнитов, в которых содержатся редкоземельные элементы.

В данной работе рассматриваются фториды неодима и диспрозия. Изучаемые соединения нашли свое применения во многих областях [1]. Фториды неодима и диспрозия являются компонентами лазерных материалов. Из них получают лазерные среды методом горячего прессования. Также возможно их использование для получения полимерных пленочных материалов [2]. С помощью фторида неодима активируют стеклокристаллические материалы [3]. В связи с этим поиск лучших методов синтеза фторидов неодима, празеодима и изучение их свойств является актуальным.

Целью работы является получение и исследование свойств фторидов неодима и празеодима.

Существуют две принципиально отличающиеся группы методов получения фторидов неодима и празеодима: гидрометаллургические (водные, «мокрые») и термические (неводные, «сухие») [4]. Так, например, фториды празеодима и неодима получают взаимодействием оксидов элементов с газообразным HF при 600 °C. Также возможен синтез разложением фтораммониевых комплексов при 400-500 °C в атмосфере N₂, Ar и других инертных газов. Одним из способов получения фторидов РЗМ является обменные реакции растворимых солей и фторидов щелочных металлов.

Фториды празеодима и неодима получали из их оксидов по следующим реакциям:



К полученному нитриду празеодима по каплям добавляли плавиковую кислоту до образования однородного осадка:



Эти соединения являются малорастворимыми в воде, поэтому в результате реакции получалась однородная взвесь. После проведения реакции проводилась разделение твердой и жидкой фазы на нутч-фильтре. Полученная твердая фаза выдерживалась в течение нескольких дней при комнатной температуре до испарения влаги.

Использование данного метода синтеза позволяет получить трифторид неодима и празеодима с выходом продукта 100%.

Был проведен рентгенофазовый анализ полученных образцов на дифрактометре Rigaku Miniflex 600 с использованием CuK α -излучения. Получены рентгенограммы фторидов неодимов и празеодима. В качестве примера на *рис. 1* приведена рентгенограмма фторида неодима.

Рентгенофазовый анализ синтезированных образцов показал, что полученный порошок представляет собой фазу NdF₃ гексагональной сингонии с параметрами решетки $a = 7,018629\text{\AA}$, $b = 7,018629\text{\AA}$, $c = 7,202404\text{\AA}$, $\alpha = 90,00^\circ$, $\beta = 90,00^\circ$, $\gamma = 120,00^\circ$.

Для PrF₃ – фаза гексагональной сингонии с параметрами решетки $a = 7,078728\text{\AA}$, $b = 7,078728\text{\AA}$, $c = 7,257201\text{\AA}$, $\alpha = 90,00^\circ$, $\beta = 90,00^\circ$, $\gamma = 120,00^\circ$.

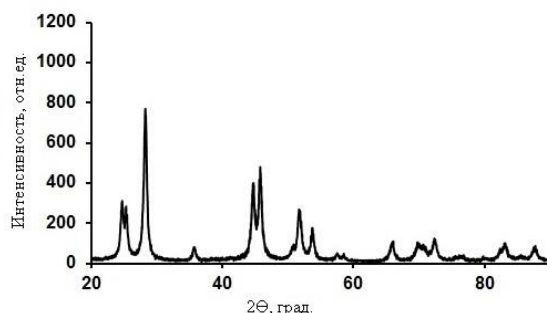


рис. 1. Рентгенограмма фторида неодима

Таким образом, были получены образцы фторида неодима и празеодима, показана их кристаллографическая структура. Полученные данные говорят о возможности использования данного метода для получения чистых фторидов, которые могут быть использованы на практике.

Список публикаций:

- [1] Гребнев В. А., Дмитриенко В. П. Получение неодима электролизом из расплавов. *Известия Томского политехнического университета* // Т.311. (№3), 76-80 (2007)
- [2] Серова В. Н., Идрисов Р. А. и др. Получение полимерных пленочных материалов, содержащих нанокристаллы фторида празеодима. *Вестник Казанского технологического университета* // Т.17. (№1), 152-154 (2014)
- [3] Щукина В. Е., Петрова О. Б. Фтороборатные стеклокристаллические материалы с большой концентрацией фторида свинца, активированные ионами Nd^{3+} . *Успехи в химии и химической технологии* // Т.26. (№11), 50-55 (2012)
- [4] Раков Э. Г. Химия и технология неорганических фторидов. МХТИ им. Д. И. Менделеева 1990. С.162

Динамический эффект растворителя в кинетике рекомбинации зарядов в возбужденных донорно-акцепторных комплексах

Михайлова Татьяна Владимировна

Волгоградский государственный университет

Иванов Анатолий Иванович, д.ф.-м.н.

mixailovavolsu@gmail.com, tf@volsu.ru

В рамках многоканальной стохастической модели [1-3] исследуется влияние динамических характеристик полярного растворителя на кинетику рекомбинации зарядов в фотовозбужденных донорно-акцепторных комплексах. Модель учитывает не только реорганизацию растворителя, но и возбуждение нескольких высокочастотных внутримолекулярных колебательных мод донорно-акцепторного комплекса и их релаксацию [1-3]. На рис. 1. показаны профили свободной энергии Гиббса для электронного состояния с разделенными зарядами (реагенты) и для нейтрального состояния комплекса (продукты) с возбуждением нескольких колебательных квантов (пунктирные линии). Начальное неравновесное состояние, сформированное импульсом накачки, изображено в виде волнового пакета, локализованного в точке А (синий волной пакет). Термализованному состоянию соответствует волновой пакет (красный), локализованный в точке В. Релаксация растворителя схематично показана синей стрелкой. В модели предполагается, что релаксация растворителя описывается функцией: $X(t) = \sum_{i=1}^2 x_i e^{-t/\tau_i}$, где τ_i и x_i - время и вес i -ой релаксационной моды растворителя [1-3].

Численное решение системы дифференциальных уравнений для функций распределения рассматриваемых электронных состояний позволило рассчитать константу скорости рекомбинации зарядов и проанализировать ее зависимость от основных параметров модели (электронной связи, веса и времени релаксации медленной моды растворителя, свободной энергии реакции, энергий реорганизации растворителя и высокочастотных мод).

Выполненное исследование показало, что разработанная многоканальная стохастическая модель способна количественно описывать динамический эффект растворителя как для неравновесной, так и равновесной рекомбинации зарядов [2-4]. Установлены наиболее важные отличия в проявлении динамического эффекта растворителя в реакциях рекомбинации зарядов, протекающих на этих стадиях [5].